

FORMULARIO DE PRESENTACIÓN DE CURSOS DE POSGRADO

1.1. Indique la denominación del curso propuesto:

Fundamentos y Aplicaciones de la Difracción de Rayos X de Polvos

1.2. Inserto en un carrera de posgrado

Sí X No

1.3. En caso de que el curso ya sea dictado en otra carrera indique la siguiente información:

Carrera	Tipo de dictado	Modalidad	Carácter

2. Equipo docente.

2.1. Responsable a cargo.

Apellido: Lamas

Nombre: Diego Germán

Documento: 18062121

Correo electrónico: dlamas@unsam.edu.ar

CUIT/CUIL: 20-18062121-1

2.2. Integrantes del equipo docente (repetir cuantas veces sea necesario)

Apellido: Lamas

Nombre: Diego Germán

Documento: 18062121

Correo electrónico: dlamas@unsam.edu.ar

CUIT/CUIL: 20-18062121-1 (CUIL)

Apellido: Ramallo

Nombre: Juan Ignacio

Documento: 37877545

Correo electrónico: juanignacioramallo@gmail.com

CUIT/CUIL: 20-37877545-1 (CUIL)

3. Fecha probable de dictado

Semestre 1er X 2do

mes: junio

4. Número máximo y mínimo de alumnos
5-50

5. Carga horaria propuesta

45 hs

5.1. Exprese la carga horaria relacionada al dictado de la actividad en horas reloj.

Modalidad	Carga teórica	Carga práctica	Total	Porcentaje
Presencial	20	25	45	100
No presencial	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="-"/>
Total	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	

6. Objetivos (2000 caracteres)

Introducir al alumno en la técnica de difracción de rayos X de polvos, incluyendo tanto los fundamentos como los aspectos experimentales y de análisis de datos más importantes. Se presentarán diversos ejemplos para mostrar los usos habituales de esta técnica: análisis cualitativo, análisis cuantitativo, refinamiento de estructura cristalina, determinación del tamaño medio de cristalita, etc. Se hará hincapié en el análisis de datos por el método de Rietveld para diversas aplicaciones. Se realizarán diversos experimentos para estudio de distinto tipo de materiales utilizando el difractómetro instalado recientemente en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la UNCUYO. Por último, se presentarán aspectos más avanzados, como las ventajas del uso de fuentes de radiación de sincrotrón.

7. Contenidos. (2000 caracteres)

Unidad 1. Introducción a la cristalografía y a la difracción de rayos X

Cristales, monocristales y policristales. Historia de la cristalografía moderna. Aplicaciones actuales.

Unidad 2. Cristalografía geométrica y simetría

Red cristalina. Celda unidad. Sistemas cristalinos. Redes de Bravais. Planos, direcciones, índices de Miller y espaciado interplanar. Elementos de simetría. Grupos puntuales y espaciales.

Unidad 3. Fundamentos de la difracción de rayos X

El fenómeno de la difracción de rayos X. Ley de Bragg. Teoría cinemática. Factor de forma atómico. Factor de estructura. Fórmula de la intensidad integrada.

Unidad 4. Instrumentación y aplicaciones de la difracción de polvos

Producción y detección de rayos X. Geometrías de los difractómetros de polvos. Filtros y monocromadores. Preparación de muestras. Colección de datos. Aplicaciones de la difracción de polvos.

Unidad 5. Análisis cualitativo y cuantitativo

Procesamiento de difractogramas. Identificación de fases. Bases de datos. Método RIR de análisis cuantitativo.

Unidad 6. Método de Rietveld

Fundamentos del método de Rietveld. Programas. Refinamiento de estructura cristalina. Aplicación al análisis cuantitativo.

Unidad 7. Ensanchamiento de picos y nanomateriales

Tamaño de cristalita y microdeformaciones. Ecuación de Scherrer. Gráficos de Williamson-Hall. Deconvolución del ancho instrumental. Análisis con el método de Rietveld.

Unidad 8. Geometría con incidencia rasante y reflectometría de rayos X

Profundidad de análisis en difracción de polvos y con incidencia rasante. Aspectos experimentales y aplicaciones. Reflectometría de rayos X. Reflexión total y ángulo crítico. Oscilaciones de Kiessig. Determinación de espesor, densidad y rugosidad en películas delgadas y multicapas.

Unidad 9. Difracción de rayos X de polvos con luz sincrotrón

Las fuentes de luz sincrotrón. Características. Estaciones experimentales de difracción de polvos. Experimentos in situ y operando: instrumentación y aplicaciones. Difracción de alta resolución.

8. Describa las actividades prácticas desarrolladas, indicando lugar donde se desarrollan y modalidad de supervisión. (Si corresponde). (2000 caracteres)

Se realizarán experimentos de difracción de rayos X de polvos en distintas muestras utilizando el difractómetro Malvern Panalytical modelo AERIS instalado recientemente en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la UNCUYO. Los difractogramas obtenidos se analizarán con software y bases de datos adquiridos a la empresa Malvern Panalytical y con programas y bases de datos gratuitos de acceso libre.

Práctica 1: Análisis cualitativo en muestras policristalinas para distintas aplicaciones

Práctica 2: Análisis cuantitativo en muestras polifásicas complejas

Práctica 3: Ejemplos de polimorfismo cristalino

Práctica 4: Refinamiento de estructura cristalina por el método de Rietveld

Práctica 5: Análisis cuantitativo por el método de Rietveld

Práctica 6: Tamaño de cristalita en nanomateriales

Práctica 7: Difracción de rayos X con incidencia rasante: análisis cualitativo en películas delgadas y recubrimientos

Práctica 8: Reflectometría de rayos X para determinación de espesor de películas delgadas

9. Bibliografía propuesta (2000 caracteres)

H. P. Klug, L. E. Alexander, X-Ray Diffraction Procedures: For Polycrystalline and Amorphous Materials, John Wiley & Sons, New York, 1974.

B. D. Cullity, Elements of X-Ray Diffraction, 2nd Ed., Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts, 1978.

C. Giacovazzo, *Fundamentals of Crystallography*, 3th Ed., IUCr Text on Crystallography, Oxford Science Publications, UK, 2011.
T. Hahn (Editor), *International Tables for Crystallography: Volume A - Space-group symmetry*, 5th Ed., International Union of Crystallography, Springer, Dordrecht, 2002.
C. J. Gilmore, J. A. Kaduk, H. Schenk (Editors), *International Tables for Crystallography: Volume H - Powder Diffraction*, 1st Ed., International Union of Crystallography, Wiley, 2019.
R. A. Young, *The Rietveld Method*, Oxford University Press, 1995.

10. Modalidad de evaluación y requisitos de aprobación y promoción. (2000 caracteres)

Examen escrito y exposición oral de resultados de las prácticas experimentales.

11. Tiempo de entrega de evaluaciones y calificaciones una vez finalizado el curso
3 (tres) semanas a partir de la fecha de la evaluación.

12. Ingrese toda otra información que considere pertinente, incluidos requisitos específicos si corresponde. (1600 caracteres)